

7. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного. — М.: Мир, 1990. — 342 с.
8. Пригожин И. От существующего к возникающему. Время и сложность в физических науках. — М.: Наука, 1985. — 327 с.
9. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой. Пер. с англ. Ю.А. Данилова. 3-е изд. — М.: Эдиториал УРСС, 2001. — 312 с.
10. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979. — 512 с.
11. Хакен Г. Синергетика. — М.: Мир, 1980. — 406 с.
12. Вернадский В.И. История природных вод. — М.: Наука, 2003. — 751 с.
13. Пиннекер Е.В., Писарский Б.И., Шварцев С.Л. и др. Основы гидрогеологии. Общая гидрогеология. — Новосибирск: Наука, 1980. — 231 с.
14. Львович М.И. Мировые водные ресурсы и их будущее. — М.: Мысль, 1974. — 448 с.
15. Алексеев В.А., Рыженко Б.Н., Шварцев С.Л. и др. Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода — порода. Т. 1. Система вода — порода в земной коре: взаимодействие, кинетика, равновесие, моделирование. — Новосибирск: Изд. СО РАН, 2005. — 244 с.
16. Ковалевский В.С. Условия формирования и прогнозы естественного режима подземных вод. — М.: Недра, 1973. — 153 с.
17. Шварцев С.Л. Гидрогеохимия зоны гипергенеза. Изд. 2-е испр. и доп. — М.: Недра, 1998. — 367 с.
18. Алексеев В.А. Кинетика и механизмы реакций полевых шпатов с водными растворами. — М.: ГЕОС, 2002. — 256 с.
19. Шварцев С.Л. Прогрессивная самоорганизация в системе вода — порода // Известия РАЕН. Секц. наук о Земле. — 2005. — Вып. 13. — С. 139–152.
20. O'Neil J.R., Taylor H.P. The oxygen isotope and cation exchange chemistry of feldspars // Amer. Miner. — 1967. — V. 52. — № 9–10. — P. 1414–1437.
21. Rubie D.C., Thompson A.B. Kinetics of metamorphic reactions at elevated temperatures and pressures: an appraisal of available experimental data // Advances in Physical Geoghemistry. V. 4. Metamorphic Reactions: kinetics, textures and deformation. — New York: Springer-Verlag, 1985. — P. 26–79.
22. Kerrick D.M., Lasaga A.C., Raeburn S.P. Kinetics of heterogeneous reactions // Reviews in Mineralogy. V. 26. Contact Metamorphism. Washington: Miner. Soc. Amer. — 1991. — P. 583–671.
23. Pilla G., Sacchi E., Zuppi G., Braga G., Ciancetti G. Hydrogeochemistry and isotope geochemistry as tools for groundwater hydrodynamic investigation in multilayer aquifers: a case study from Lomellina, Po plain, South-Western Lombardy, Italy // Hydrogeol. J. — 2006. — V. 14. — № 5. — P. 795–808.
24. Cloutier V., Lefebvre R., Savard M.M., Bourque E., Therrien R. Hydrogeochemistry and groundwater origin of the Basses-Laurentides sedimentary rock aquifer system, St. Lawrence Lowlands, Quebec, Canada // Hydrogeol. J. — 2006. — V. 14. — № 4. — P. 573–590.
25. Gascoyne M., Davison C.C., Ross J.D., Pearson R. Saline groundwaters and brines in plutons in the Canadian Shield // Geol. Assoc. of Canada Special Paper. — 1987. — № 33. — P. 53–68.
26. Gascoyne M. Hydrogeochemistry, groundwater ages and sources of salts in a granitic batholith on the Canadian Shield, southeastern Manitoba // Appl. Geochem. — 2004. — V. 19. — № 4. — P. 519–560.

Поступила 02.07.2007 г.

УДК 550.42:577.4(571.1)

## ФОРМЫ МИГРАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ БАСЕЙНА р. КАТУНЬ В ЕЕ СРЕДНЕМ ТЕЧЕНИИ

Ю.Ю. Лоханова, Н.М. Рассказов

Томский политехнический университет  
E-mail: Julia-tomsk2004@rambler.ru

Приведена характеристика состояния химических элементов состава подземных вод бассейна р. Катунь (Горный Алтай), выделены основные формы миграции макро- и микроэлементов:  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ . Проведены статистические расчеты, целью которых являлось подтверждение результатов моделирования процессов комплекссообразования.

### Введение

Исследованием форм миграции элементов в природных водах занимались в разные годы зарубежные и отечественные исследователи: Р.М. Гэррелс, Ч.Л. Крайст, С.Л. Шварцев, С.Р. Крайнов, В.М. Швец, Г.Б. Наумов, Б.Н. Рыженко, П.Н. Линник, Б.И. Набиванец и многие другие. Достижения этих исследователей позволяют нам решать задачи моделирования процессов формирования состава подземных вод.

Целью данной работы является выделение главных форм миграции ряда компонентов в подзем-

ных водах бассейна р. Катунь (Горный Алтай) в среднем течении.

Растворенное состояние химических элементов в природных водах чрезвычайно разнообразно. Некоторые элементы склонны образовывать только сравнительно простые соединения, другие — сложные ассоциаты, в том числе с органическими лигандами. Основные формы миграции элементов зависят не только от свойств самого элемента (катионы или анионы), но и от внешних факторов миграции (рН, Eh среды, активные концентрации ионов-комплексобразователей и др.).

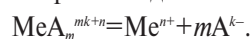
С.Р. Крайнов и В.М. Шве́ц считают, что «миграция элементов в подземных водах в виде сложных ионных и молекулярных ассоциатов имеет очень важные последствия. Разные соединения одного и того же элемента имеют различные термодинамические параметры (свободные энергии, коэффициенты ионной и молекулярной диффузии). Поэтому процессы массопереноса, растворения-кристаллизации, ионного обмена и прочие, составляющие основу процесса *формирования химического состава подземных вод*, невозможно правильно интерпретировать и прогнозировать без знания форм переноса элементов. Именно эти формы определяют возможность и геологическую значимость процессов, а также их кинетику. При образовании устойчивых комплексных соединений происходит смещение равновесий в геохимических процессах (в растворении, выщелачивании, осаждении и соосаждении, сорбции, ионном обмене, окислении-восстановлении) в сторону водной фазы» [1. С. 33].

Физико-химические расчеты играют роль ориентира при гидрогеохимических исследованиях, их результаты могут быть использованы для приблизительной оценки и вероятностного прогнозирования реальных геохимических процессов. Однако, эти расчеты зачастую базируются на *аналитических* данных о составе вод, суммирующих свободные и связанные формы элементов, что не вполне правомерно при попытке воссоздать процессы, идущие в реальной системе.

Материалом для исследований явились данные, полученные в результате опробования водных объектов в регионе, которые проводились сотрудниками Томского филиала института нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН и сотрудниками Томского политехнического университета с участием авторов (2005 г.).

*Методика физико-химических исследований комплексообразования* достаточно подробно изложена в [1–3]. Базовые положения теории заключаются в следующем.

Так называемые комплексные соединения образуются при взаимодействии иона-комплексообразователя (Me) и лигандов (A) органического или неорганического происхождения:



Характеристикой комплексного соединения служит константа устойчивости  $K_y$  –

$$K_{y(T,P)} = \frac{[\text{MeA}_m^{mk+n}]}{[\text{Me}^{n+}][\text{A}^{k-}]^m},$$

где  $[\text{Me}^{n+}]$  – молярная концентрация элемента с зарядом  $n+$  в незакомплексованной форме;  $[\text{A}^{k-}]$  – молярная концентрация адденда A с зарядом  $k-$ ;  $[\text{MeA}_m^{mk+n}]$  – молярная концентрация комплексного соединения, имеющего суммарный заряд  $mk+n$ .

Диссоциация комплексного соединения, как правило, происходит ступенчато по типовой схеме:  $\text{Me}(\text{A})_2 \leftrightarrow \text{MeA}^+ + \text{A}^- \leftrightarrow \text{Me}^{2+} + 2\text{A}^-$ , поэтому использу-

ют как полные константы устойчивости, так и ступенчатые. В равновесных стандартных условиях (при 25 °C и 0,1 Па) константа устойчивости комплексного соединения  $K_y$  связана со свободной энергией Гиббса выражением  $\Delta G^0 = -1,364 \cdot \lg K_y$ , где  $\Delta G^0 = \sum \Delta G_{\text{прод}}^0 - \sum \Delta G_{\text{исх}}^0$ .

Энергия Гиббса, рассчитанная такими исследователями как И.Л. Шок, Х.К. Хэлгесон, П.Н. Линник, Б.И. Набиванец, И.И. Волков, Г.А. Соломин, И.К. Карпов и др. для различных соединений, включается в базу данных. На основании энергий Гиббса и данных о физических условиях реакции, вычисляются константы устойчивости комплекса элемента. Но количественные соотношения между состояниями какого-либо присутствующего в воде элемента-комплексообразователя зависят не только от констант устойчивости его соединений, но и от концентраций аддендов. Особое значение для комплексообразования имеют фульвокислоты, т. к. способность к комплексообразованию гуминовых и прочих органических кислот намного слабее.

Расчет концентраций различных форм миграции элементов в подземных водах производился с помощью программного модуля для ПК HydrGeo (автор – М.Б. Букаты, ТФ ИНГГ СО РАН) [4].

#### Описание объекта исследований

Бассейн среднего течения р. Катунь (Горный Алтай) занимает площадь от устья реки Коксы до устья р. Смульты. Гидрогеологические условия определяются значительной расчлененностью рельефа, активным водообменном и наличием двух водоносных комплексов пород – аллювиальных образований, приуроченных к долинам рек, и трещиноватых коренных, в основном палеозойских, пород, разбитых дизъюнктивными тектоническими разрушениями, которые активно влияют на движение подземных вод. Воды зон этих нарушений выявлены и изучены слабо. Основное значение имеет воды трещиноватости коренных пород и аллювиальных отложений.

В связи с этим процесс формирования их химического состава протекает в различных условиях. Модуль подземного стока составляет в регионе 3,2...4,0 л/с·км². Приточность находится в пределах 0,1...0,4 км³/год [5]. Интервал опробования в скважинах в основном составляет до 100 м от дневной поверхности (максимальная глубина скважин 160 м).

Подземные воды рассматриваемой территории повсеместно пресные с минерализацией 70...700 мг/л, как правило, нейтральные или слабощелочные (рН 7,0...8,8); по составу гидрокарбонатные кальциевые. Более детальная характеристика геолого-гидрогеологических условий и геохимии подземных вод бассейна среднего течения р. Катунь дана в публикациях [6–9].

В данной работе изложены результаты исследований форм миграции основных макро- и микрокомпонентов, особенно тщательно нормируемых,

без учета элемент-органических форм. Схема расположения точек опробования приведена на рис. 1, исходные данные для расчетов – в табл. 1, результаты расчетов представлены в табл. 2.

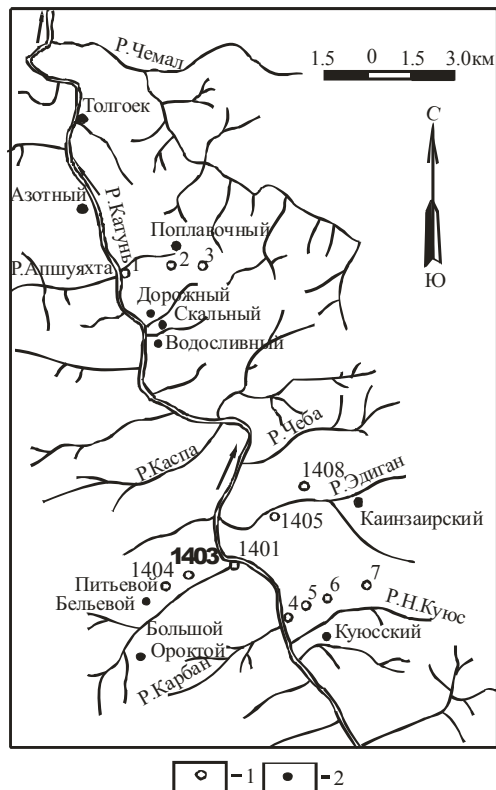


Рис. 1. Схема расположения точек наблюдений: 1) наблюдательные (режимные) гидрогеологические скважины; 2) родники и их номера

#### Результаты физико-химических расчетов

В табл. 2 показаны результаты расчетов комплексообразования в водах опробованных режимных родников, которые позволяют сделать следующие выводы.

Без учета соединений с органическими радикалами, преимущественно в ионной форме, мигрируют ионы Na, K, Ca, Mg, Cl,  $\text{HCO}_3^-$ , F,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{HCO}_3^-$ , Fe и Mn. Доля их составляет, как правило, более 90 %, что вполне закономерно, учитывая околонейтральные значения pH вод, окислительную геохимическую обстановку, низкую минерализацию растворов и невысокие значения их ионной силы (0,01...0,02).

Среди форм миграции макроэлементов (табл. 2) преобладают комплексы-ассоциаты с участием доминирующих анионов  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$  изредка встречаются соединения с Cl<sup>-</sup> и F<sup>-</sup>. Гидроокисные формы миграции более характерны для элементов-гидролизатов: основной формами миграции  $\text{Si}^{4+}$  (более 50 %) является  $\text{H}_4\text{SiO}_4$ .

В то же время, для Al практически единственной миграционной формой является продукты диссоциации Al ( $\text{AlO}_2^-$  и  $\text{AlO}(\text{OH})_2^-$ ), т. к. концен-

трации Al столь малы, что недостаточны для образования слаборастворимых гидроокислов  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{AlOH}^{2+}$  или  $\text{AlO}(\text{OH})_3$ . Si, содержащийся в водах Катунского полигона в количествах, близких к предельно допустимому, находится в виде двух основных форм миграции – доминирующей –  $\text{H}_4\text{SiO}_4$  и подчиненной –  $\text{SiO}_2$ , в количестве 52 и 48 % соответственно.

Таблица 1. Использованные в расчетах данные по составу подземных вод бассейна среднего течения р. Катунь (по результатам анализов ТФ ИНГГ и ТПУ, 2005 г., кроме  $\text{CO}_3^{2-}$  – 1999 г.;  $\text{Hg}^{2+}$  – 2003 г.)

Показатель	Ед. изм.	Пункты отбора проб - родники					
		Толго- ек	До- рож- ный	Скаль- ный	Каин- заир- ский	Пи- тье- вой	Куюс- ский
pH		7,9	7,8	7,7	7,7	7,6	8
Ионная сила	моль/л	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Минерализация		360,0	350,0	390,0	290,0	370,0	290,0
Na <sup>+</sup>		3,50	4,00	7,00	0,80	8,00	5,00
Ca <sup>2+</sup>		44,0	56,0	60,0	60,0	72,0	52,0
Mg <sup>2+</sup>		9,80	20,70	25,60	12,20	9,80	10,50
K <sup>+</sup>		1,50	1,10	1,20	1,50	0,80	0,90
Fe <sup>2+</sup>		0,8	0,01	0,05	0,08	0,07	0,03
Fe <sup>3+</sup>		2	0,1	0,02	0,02	0,02	0,02
Mn <sup>2+</sup>		68,70	18,60	20,40	12,00	10,40	12,70
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>		0,10	0,08	0,10	0,10	0,07	0,06
Al <sup>3+</sup>		0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
Cl <sup>-</sup>		1,56	1,42	1,42	3,55	2,84	1,28
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>		268,4	292,8	366,0	268,4	329,4	244,0
F <sup>-</sup>		0,15	0,12	0,56	0,10	0,22	0,18
NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>		0,39	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>		4,03	3,33	5,90	17,24	16,91	3,25
SiO <sub>2</sub> <sup>-</sup>		3,70	3,70	3,35	4,15	4,15	4,80
CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>		0,4	1,2	0,4	0,6	0,4	0,4
Pb <sup>2+</sup>		2,73	1,25	1,09	0,46	–	0,17
Cu <sup>2+</sup>		10,6	1,98	3,28	0,75	–	0,03
Cd <sup>2+</sup>		0,11	0,1	0,09	0,03	–	0,07
Li <sup>+</sup>		9,00	7,00	9,00	8,00	–	9,00
Zn <sup>2+</sup>		29,2	49,3	26,7	0,7	–	1,93
Hg <sup>2+</sup>		0,002	0,002	0,001	0,003	–	0,001

По результатам расчетов, основными миграционными формами для Mn оказались  $\text{Mn}^{2+}$  (более 70 %), а так же  $\text{MnHCO}_3^+$ ,  $\text{MnCO}_3^0$  и  $\text{Mn}(\text{HCO}_3)_2$ .

Несколько иные формы миграции характерны для Fe. В данной геохимической обстановке основной формой миграции Fe является  $\text{Fe}(\text{OH})_2^+$  (более 68 %), а второстепенными –  $\text{Fe}(\text{OH})_3^0$ ,  $\text{Fe}(\text{OH})_2^+$ ,  $\text{Fe}(\text{OH})_4^-$ . Из соединений Fe двухвалентного преобладает ион  $\text{Fe}^{2+}$ , второстепенными его формами являются  $\text{FeHCO}_3^+$ ,  $\text{FeCO}_3^0$ ,  $\text{Fe}(\text{HCO}_3)_2$ .

Приведенные на рис. 2 результаты расчета основных форм миграции микрокомпонентов в водах бассейна р. Катунь показывают, что доминирующими в растворе являются гидрокарбонат- и карбонат-комплексы с ионами Li, Cu, Zn, Cd и Pb.

**Таблица 2.** Результаты расчета основных форм миграции макрокомпонентов в подземных водах, %

Формы миграции	Пункты отбора проб					
	1	2	3	4	5	6
$\text{NH}_4^+$	<u>0,09</u> 95,05	<u>0,07</u> 90,19	<u>0,09</u> 93,76	<u>0,09</u> 95,10	<u>0,06</u> 89,89	<u>0,05</u> 91,38
$\text{NH}_4\text{HCO}_3$	0,00	0,00	0,26	0,19	0,24	0,19
$\text{NH}_4\text{CO}_3^-$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{NH}_4\text{Cl}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{NH}_4\text{OH}$	0,00	–	0,39	0,41	0,38	0,39
$(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$	0,01	0,00	5,19	3,89	9,10	7,64
$\text{NH}_3^0$	0,00	–	0,39	0,41	0,38	0,39
$\text{NO}_2^-$	<u>039</u> 99,86	<u>0,009</u> 99,86	<u>0,009</u> 99,87	<u>0,009</u> 99,86	<u>0,009</u> 99,87	<u>0,009</u> 99,86
$\text{HNO}_2$	0,00	0,13	–	–	–	–
$\text{Mg}^{2+}$	<u>9,11</u> 92,97	<u>20,07</u> 96,96	<u>24,75</u> 96,68	<u>11,9</u> 97,56	<u>9,49</u> 96,92	<u>10,23</u> 97,41
$\text{MgHCO}_3^+$	1,33	0,56	3,07	2,27	2,87	2,42
$\text{MgCO}_3$	0,05	0,02	0,10	0,08	0,09	0,08
$\text{MgCl}^+$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{Mg}(\text{HCO}_3)_2$	0,06	0,03	0,09	0,05	0,09	0,06
$\text{MgCl}_2$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{MgF}^+$	0,00	1,15	0,04	0,03	0,02	0,01
$\text{MgOH}^+$	0,00	–	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{Na}^+$	<u>3,45</u> 98,58	<u>3,98</u> 99,43	<u>6,96</u> 99,37	<u>0,79</u> 99,54	<u>7,95</u> 99,40	<u>4,98</u> 99,52
$\text{NaHCO}_3$	0,37	0,07	0,61	0,44	0,59	0,47
$\text{NaCl}$	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{NaH}_2\text{SiO}_4$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{NaHSiO}_3$	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{Al}^{3+}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$(\text{AlO}_2)^-$	<u>0,24</u> 96,64	<u>0,25</u> 100,00	<u>0,23</u> 92,89	<u>0,23</u> 92,82	<u>0,23</u> 92,88	<u>0,23</u> 92,82
$\text{Al}(\text{OH})_3$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$(\text{AlO}(\text{OH}))_2^-$	3,6	0,00	7,11	7,18	7,12	7,17
$\text{SiO}_2$	<u>1,81</u> 48,91	<u>1,81</u> 48,91	<u>1,64</u> 48,91	<u>2,03</u> 48,91	<u>2,03</u> 48,91	<u>2,35</u> 48,91
$(\text{H}_3\text{SiO}_4)^-$	0,11	0,11	0,11	0,11	0,11	0,11
$\text{H}_4\text{SiO}_4$	50,84	50,84	50,84	50,84	50,84	50,84
$(\text{HSiO}_3)^-$	0,13	0,12	0,13	0,13	0,13	0,13
$\text{K}^+$	<u>1,37</u> 91,71	<u>1,09</u> 99,41	<u>1,19</u> 99,36	<u>1,49</u> 99,54	<u>0,79</u> 99,39	<u>0,89</u> 99,51
$\text{KHCO}_3$	0,03	0,00	0,63	0,46	0,60	0,48
$\text{KCO}_3$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00
$\text{KCl}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{K}_2\text{CO}_3$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{Ca}^{2+}$	<u>42,49</u> 96,56	<u>54,11</u> 96,62	<u>57,73</u> 96,22	<u>58,34</u> 97,24	<u>69,41</u> 96,39	<u>50,46</u> 97,04
$\text{CaHCO}_3^+$	2,98	0,85	3,28	2,45	3,20	2,61
$\text{CaCO}_3$	0,22	0,06	0,24	0,18	0,23	0,19
$\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$	0,15	0,08	0,18	0,09	0,17	0,11
$\text{Ca}(\text{CO}_3)_2^{2-}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{CaNO}_3^+$	0,08	–	0,07	0,02	–	0,03
$\text{CaCl}^+$	0,01	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{CaCl}_2$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{CaF}^+$	0,01	0,36	0,01	0,01	0,00	0,00
$\text{Mn}^{2+}$	<u>48,11</u> 70,03	<u>14,45</u> 77,67	<u>15,53</u> 76,33	<u>9,74</u> 81,19	<u>8,03</u> 77,17	<u>10,18</u> 80,19
$(\text{MnHCO}_3)^+$	0,01	0,00	11,89	9,50	11,49	9,99
$\text{MnCO}_3$	0,01	0,00	10,74	8,69	10,39	9,15

$\text{Mn}(\text{HCO}_3)_2$	0,00	0,00	0,99	0,57	0,92	0,64
$(\text{MnCl})^+$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{MnCl}_2$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{MnOH}^+$	0,00	–	0,03	0,03	0,03	0,03
$\text{Fe}^{2+}$	<u>0,72</u> 90,56	<u>0,009</u> 94,66	<u>0,05</u> 94,26	<u>0,076</u> 95,63	<u>0,066</u> 94,51	<u>0,029</u> 95,37
$(\text{FeHCO}_3)^+$	0,04	0,00	2,89	2,21	2,77	2,34
$\text{FeCO}_3$	0,03	0,00	2,09	1,62	2,09	1,72
$\text{Fe}(\text{HCO}_3)_2$	0,01	0,00	0,49	0,27	0,44	0,30
$\text{FeCl}^+$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$\text{FeOH}^+$	0,00	–	0,25	0,27	0,25	0,27
$\text{Fe}^{3+}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$(\text{FeOH})^{2+}$	6,23	4,79	3,26	2,80	2,82	3,06
$(\text{Fe}(\text{OH})_2)^+$	<u>1,41</u> 70,41	<u>0,068</u> 68,21	<u>0,014</u> 71,23	<u>0,018</u> 88,86	<u>0,016</u> 78,91	<u>0,002</u> 80,30
$\text{Fe}(\text{OH})_3$	23,32	26,90	25,26	8,02	17,96	16,48
$(\text{Fe}(\text{OH})_4)^-$	0,10	0,19	0,35	0,43	0,43	0,29

Примечание: мг/л – содержание формы компонента в воде, число в знаменателе (%), приходящийся на это содержание в воде

Группа  $\text{OH}^-$  дает второстепенные комплексы Pb, Zn, Cu и Cd в порядке уменьшения роли данного комплекса с названными элементами, но в среднем роль этих комплексов не превышает 1...2 % в случае Zn, и 20...40 % в случае Pb.

Комплексы миграции Hg, рассчитанные нами, указывают на преобладающую роль метилированной ртути  $(\text{Hg}(\text{NH}_3)_2)^{2+}$ . Очевидно, что на долю  $\text{Hg}(\text{NH}_3)_2^{2+}$  приходится не более 1 % от суммарного количества ртути в растворе.

Следует отметить, что неучтенные нами взаимодействия ионов раствора с органическими соединениями также могут влиять как на образование форм миграции элементов, так и на процессы минералообразования. Еще одним следствием присутствия в растворе органических веществ является преимущественное связывание ими микроэлементов, в то время как  $\text{Ca}^{2+}$  и  $\text{Mg}^{2+}$  образуют очень слабые по прочности соединения.

Фульвокислоты связывают в прочные органо-комплексы от 0,0н до 50 % содержания микроэлементов (особенно,  $\text{Cd}^{2+}$ ). Минимальная степень связывания ионов характерна для  $\text{Li}^+$  и  $\text{Zn}^{2+}$  (0,0н %, рис. 2, г, д), в то время как фульво-комплексы способны связывать от 0,0 до 16 % первоначального количества катионов  $\text{Pb}^{2+}$  и  $\text{Cu}^{2+}$  (рис. 2, а, б). И, наконец, максимальная степень связи характерна для  $\text{Cd}^{2+}$ , достигая от 3 до 60 % (рис. 2, в).

#### Основные выводы

Компоненты Ca, Na, K, Mg, Fe, Cl и F мигрируют преимущественно в ионной форме, составляющей 95...99 % от их общего количества. Среди разнообразных форм миграции таких элементов или соединений как Mn и  $\text{NH}_4$ , ионная форма занимает только до 80...95 %; для Cd, Pb – всего 5...40 %, а для Cu, Zn и Li она составляет от 99...76 %. Максимальные значения связанности с фульвокислотами характерны для Cd (3...60 %). При гидрогеохимиче-



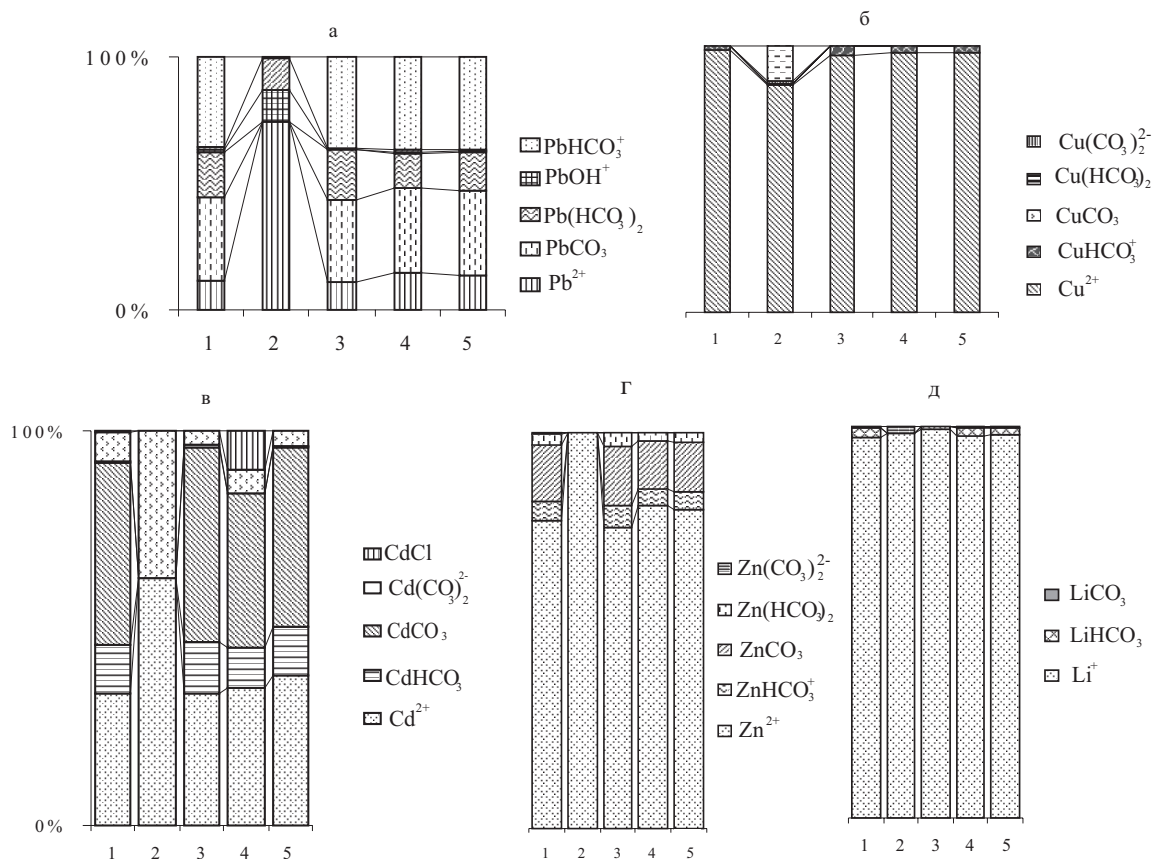


Рис. 2. Результаты расчета основных форм миграции микрокомпонентов

ских исследованиях необходимо обязательно учитывать степень связанности элементов в прочные комплексные соединения, т. к. степень их связан-

ности заметно сказывается на процессах миграции, сорбции, окисления-восстановления элементов или осаждения-растворения их соединений.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крайнов С.Р., Швеи В.М. Геохимия подземных вод хозяйственно-питьевого назначения. — М.: Недра, 1987. — 237 с.
2. Гаррелс Р.М., Крайст Ч.Л. Растворы, минералы, равновесия. — М.: Мир, 1968. — 368 с.
3. Линник П.Н., Набиванец Б.И. Формы миграции металлов в пресных поверхностных водах. — Л.: Гидрометеиздат, 1986. — 272 с.
4. Букаты М.Б. Геоинформационные системы и математическое моделирование. — Томск: Изд-во ТПУ, 2002. — 75 с.
5. Шварцев С.Л., Воротников Б.А., Кусковский В.С. и др. Гидрогеохимические условия бассейна р. Катунь в зоне влияния проектируемого водохранилища // Катунский проект: проблемы экспертизы: Матер. к общ.-науч. конф. 13–14 апреля 1990 г. — Новосибирск, 1990. — Т. 1. — С. 62–63.
6. Шварцев С.Л., Кусковский В.С., Савичев О.Г., Копылова Ю.Г., Лукин А.А., Домрочева Е.В. Эколого-геохимическое состояние подземных вод бассейна Катунь, используемых для хозяйственно-питьевых целей // Тенденции и перспективы развития гидрогеологии и инженерной геологии в условиях рыночной экономики России. VI Толстухинские чтения: Тез. докл. научно-методич. конф. / СПбГИ(ТУ). — СПб., 1999. — С. 135–140.
7. Катунь: экогеохимия ртути / Под ред. Н.А. Рослякова, В.С. Кусковского, Г.В. Нестеренко, С.Л. Шварцева и др. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1992. — 180 с.
8. Лоханова Ю.Ю., Рассказов Н.М. Геохимия природных вод бассейна р. Катунь в ее среднем течении // Известия Томского политехнического университета. — 2006. — Т. 309. — № 6. — С. 32–37.
9. Шварцев С.Л. Гидрогеохимия зоны гипергенеза. — 2-е изд., исправл. и доп. — М.: Недра, 1998. — 366 с.
10. Копылова Ю.Г. Органическое вещество в подземных водах горных областей юго-востока Западной Сибири и изучение влияния органических кислот на миграцию химических элементов в водах. — Томск: Изд-во ТПИ, 1984. — 49 с.

Поступила 20.12.2006 г.